Электронный топологический переход 3½ рода в бериллии

Г.П. Микитик, Ю.В. Шарлай

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина E-mail: mikitik@ilt.kharkov.ua, sharlai@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 1 июня 2015 г., опубликована онлайн 23 октября 2015 г.

Проведен анализ известных из литературы экспериментальных данных по температурной зависимости магнитной восприимчивости бериллия. Показано, что эта зависимость может быть объяснена, если учесть, что в бериллии вблизи уровня Ферми имеется точка электронного топологического перехода $3\frac{1}{2}$ рода.

Проведено аналіз відомих з літератури експериментальних даних по температурній залежності магнітної сприйнятливості берилію. Показано, що ця залежність може бути пояснена, якщо врахувати, що в берилії поблизу рівня Фермі ϵ точка електронного топологічного переходу $3\frac{1}{2}$ роду.

PACS: **71.30.+h** Переходы металл–изолятор и другие электронные переходы; **71.18.+y** Поверхность Ферми; расчеты и измерения, эффективная масса, *g*-фактор.

Ключевые слова: электронный топологический переход, линии вырождения зон, магнитная восприимчивость, бериллий.

1. Введение

Хорошо известно, что электронные топологические переходы 21/2 рода имеют место в тех точках зоны Бриллюэна, в которых закон дисперсии энергии электронов от квазиимпульса имеет минимум, максимум или седловую точку [1–4]. В этих точках при критическом значении энергии появляется (исчезает) новая полость поверхности Ферми или рвется (образуется) перемычка на ней. Известно также [2], что если в зоне Бриллюэна существует линия вырождения двух энергетических зон, то поверхность Ферми металла может иметь самопересекающийся вид, и точки линии вырождения, в которых такая поверхность появляется или исчезает, тоже соответствуют электронным топологическим переходам. В этих точках общая энергия двух вырожденных зон достигает своего минимума или максимума. В работе [5] детально исследованы электронные топологические переходы, связанные с появлением (исчезновением) самопересекающихся изоэнергетических поверхностей. Было показано, что эти переходы являются электронными топологическими переходами 3½ рода согласно классификации Лифшица [1]. Было также отмечено, что эти переходы могут

быть экспериментально обнаружены и исследованы с помощью магнитной восприимчивости, которая испытывает гигантскую диамагнитную аномалию в окрестности такого перехода.

В настоящей работе сначала изложены необходимые нам для дальнейшего результаты статьи [5], а затем проанализированы экспериментальные данные по температурной зависимости магнитной восприимчивости бериллия, полученные в работе [6]. Результаты нашего анализа показывают, что в этом металле точка электронного топологического перехода 3½ рода была фактически экспериментально обнаружена много лет назад Гречневым, Свечкаревым и Середой [6].

2. Электронные топологические переходы 3½ рода

Известно, что вырождение двух электронных энергетических зон в кристалле может иметь место на осях симметрии его зоны Бриллюэна. Кроме того, как было показано Херрингом [7], в кристаллах существуют линии случайного вырождения зон. Термин «случайное» означает, что вырождение электронных состояний не вызвано их симметрией. Таких линий довольно много в металлах с центром инверсии и слабым спин-орби-

тальным взаимодействием. Действительно, на осях симметрии даже простых металлов весьма часто обнаруживаются точки пересечения двух энергетических зон [8]. Через такие точки перпендикулярно оси, как правило, всегда проходят линии случайного вырождения этих зон [7]. Эти линии либо оканчиваются на границах зоны Бриллюэна, либо являются замкнутыми кривыми в ней. На всякой такой линии энергия вырожденных зон — периодическая функция квазиимпульса, и поэтому всегда имеются точки ее минимума и максимума. Именно в этих точках появляются или исчезают самопересекающиеся изоэнергетические поверхности. Таким образом, мы приходим к выводу, что в металлах с центром инверсии и слабым спин-орбитальным взаимодействием должно быть достаточно много упомянутых выше электронных топологических переходов 31/2: их число сопоставимо с числом переходов 2½ рода. Анализ литературы показывает, что линии вырождения зон существуют, например, в Be, Mg, Zn, Cd, Al, графите [9] и многих других металлах. В экспериментах линии вырождения зон в металлах могут быть, в принципе, обнаружены с помощью фазового анализа осцилляций де Гааза-ван Альфена или Шубникова-де Гааза, поскольку фаза этих осцилляций определяется числом линий контакта зон, пронизывающих соответствующее поперечное сечение поверхности Ферми [10–12].

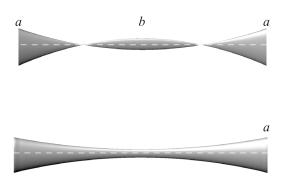
Рассмотрим точку на линии вырождения зон a и b, в которой энергия этих зон достигает своего экстремума ε_c . В окрестностях такой точки зависимости энергий двух близких к вырождению зон от квазиимпульса \mathbf{p} всегда могут быть представлены в виде [5]

$$\varepsilon_{a,b}(\mathbf{p}) = \varepsilon_c + Bp_z^2 + \mathbf{v}_{\perp}\mathbf{p}_{\perp} \pm \left[b_{xx}p_x^2 + b_{yy}p_y^2\right]^{1/2}, \quad (1)$$

где ось p_z направлена по касательной к линии вырождения зон в точке экстремума энергии, $\mathbf{p}_\perp = (p_x, p_y)$, постоянные B, b_{xx} , b_{yy} и $\mathbf{v}_\perp = (v_x, v_y)$ — параметры спектра. Знак B положительный, если критическое значение энергии ε_c соответствует минимуму энергии, и отрицательный для случая максимума энергии. Как указано в работе [5], вид самопересекающихся изоэнергетических поверхностей, определяемых спектром (1), существенно зависит лишь от одной комбинации параметров:

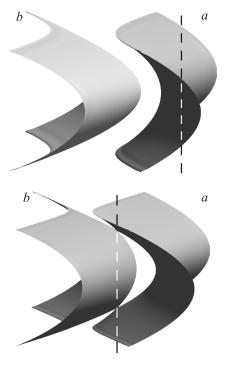
$$\tilde{a}^2 = \frac{v_x^2}{b_{xx}} + \frac{v_y^2}{b_{yy}}.$$
 (2)

Если $\tilde{a}^2 < 1$, то при изменении энергии Ферми ε_F металла относительно критического значения ε_c появление самопересекающихся изоэнергетических поверхностей происходит так, как изображено на рис. 1. Отметим, что этот топологический переход можно трактовать как комбинацию двух переходов: разрыв перемычки на изоэнергетической поверхности одной зоны и одно-



 $Puc.\ 1.$ Электронный топологический переход $3\frac{1}{2}$ рода в бериллии. Внизу показана часть дырочной «короны» второй энергетической зоны (зоны a), внутри которой проходит линия вырождения этой зоны с третьей энергетической зоной бериллия (зоной b). Такая поверхность имеет место при $\varepsilon_F < \varepsilon_c$. Вверху показана самопересекающаяся поверхность Ферми при $\varepsilon_F > \varepsilon_c$. Шейка дырочной «короны» разорвана, появился участок поверхности, отвечающий третьей зоне бериллия. Линия вырождения второй и третьей зон показана штриховой линией.

временное появление новой замкнутой поверхности для другой зоны. Иная ситуация имеет место при $\tilde{a}^2 > 1$. Хотя в этом случае при смещении ϵ_F тоже происходит появление самопересекающейся изоэнергетической поверхности, но изменения топологии поверхностей Ферми для каждой из зон при этом нет, рис. 2. Иными слова-



Puc.~2.~ Поверхность Ферми металла в окрестности ε_{c} при $\tilde{a}^{2} > 1.~$ Вверху показан случай $\varepsilon_{F} < \varepsilon_{c}.~$ Внизу $\varepsilon_{F} > \varepsilon_{c};~$ появилось самопересечение поверхности Ферми. Линия вырождения зон a и b изображена штриховой линией.

ми, появление или исчезновение самопересекающихся изоэнергетических поверхностей еще не означает, что имеет место электронный топологический переход. Такой переход осуществляется только при $\tilde{a}^2 < 1$ [5]. В этом смысле было бы точнее называть этот переход комбинированным, а не переходом, при котором появляются или исчезают самопересекающиеся изоэнергетические поверхности.

Когда уровень Ферми ε_F лежит в окрестности ε_C , плотность электронных состояний ν есть сумма ее регулярной части и неаналитического по энергии вклада $\delta\nu(\varepsilon_F)$. Последний определяется электронным топологическим переходом и отличен от нуля при $\Delta\varepsilon_F \equiv (\varepsilon_F - \varepsilon_C) \, {\rm sgn} \, (B) > 0$,

$$\delta v(\varepsilon_F) = \frac{4(\Delta \varepsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3 |B|^{1/2} (1 - \tilde{a}^2)^{3/2} (b_{xx} b_{yy})^{1/2}}.$$
 (3)

Здесь sgn(B) = 1 при B > 0 и sgn(B) = -1 при B < 0. В формуле (3) мы учли двукратное вырождение электронных состояний по спину. Выражение (3) справедливо только при $\tilde{a}^2 < 1$. При $\tilde{a}^2 > 1$ особый вклад в плотность состояний не возникает, что согласуется с отсутствием электронного топологического перехода в этом спучае

Формула (3) показывает, что при $\tilde{a}^2 < 1$ имеет место электронный топологический переход 3½ рода по классификации Лифшица [1,2]. При этом особенность в электронной плотности состояний более слабая, чем при обычных электронных топологических переходах $2\frac{1}{2}$ рода, для которых $\delta v(\varepsilon_F) \propto (\Delta \varepsilon_F)^{1/2}$ [1–4]. Изменение типа особенности связано с тем, что, например, при появлении нового участка поверхности Ферми на рис. 1, поперечные размеры этого участка пропорциональны $\Delta \varepsilon_F$ и, следовательно, малы по сравнению с его продольным размером, который пропорционален $(\Delta \varepsilon_F)^{1/2}$. В случае же электронного топологического перехода 2½ рода все размеры нового участка порядка $(\Delta \varepsilon_F)^{1/2}$. Поэтому при электронных топологических переходах 3½ рода будут более слабыми особенности всех тех физических величин, которые пропорциональны электронной плотности состояний или ее производной по энергии. Это, конечно, усложняет экспериментальное обнаружение этих переходов. Однако орбитальная магнитная восприимчивость электронов не определяется плотностью их состояний. Как следует из результатов работы [13], при электронных топологических переходах $3\frac{1}{2}$ рода компонента χ_{zz} тензора магнитной восприимчивости испытывает гигантскую диамагнитную аномалию в слабых магнитных полях:

$$\chi_{zz}(\varepsilon_F) = -\frac{e^2}{6\pi^2 c^2 \hbar} \left(\frac{b_{xx} b_{yy}}{|B|} \right)^{1/2} \frac{(1 - \tilde{a}^2)^{3/2}}{T^{1/2}} F\left(\frac{\Delta \varepsilon_F}{T} \right), (4)$$

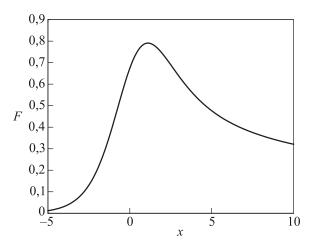


Рис. 3. Функция F(x), определяемая формулой (5), для сравнительно небольших значений своего аргумента. При $x\gg 1$ выражение (5) дает: $F(x)\approx x^{-1/2}$, а при больших отрицательных x находим: $F(x)\approx \sqrt{\pi}\exp\left(-|x|\right)$.

где $\Delta \varepsilon_F \equiv (\mu - \varepsilon_c) \, \text{sgn}(B)$, μ — химический потенциал электронов металла при температуре T, а функция F(x) определяется следующим выражением:

$$F(x) = \int_{0}^{\infty} \frac{dy}{4\sqrt{y}} \left[\cosh\left(\frac{y-x}{2}\right) \right]^{-2}.$$
 (5)

График функции F(x) представлен на рис. 3. (На рис. 2 работы [13] показана функция (1/2)F(x) вместо F(x).) Необходимо подчеркнуть, что формула (4) описывает вклад в магнитную восприимчивость, связанный только с близкими к вырождению электронными состояниями зон a и b.

При низких температурах, $T \to 0$, множитель $T^{-1/2}F(\Delta\varepsilon_F/T)$ в формуле (4) переходит в $(\Delta\varepsilon_F)^{-1/2}$ при $\Delta\varepsilon_F > 0$ и в нуль при $\Delta\varepsilon_F < 0$. Таким образом, мы получаем расходящийся диамагнитный пик в восприимчивости при малых $\Delta\varepsilon_F$. С другой стороны, при $\tilde{a}^2 > 1$ какая-либо аномалия в χ_{zz} отсутствует. Эти свойства магнитной восприимчивости открывают возможность экспериментального обнаружения электронных топологических переходов $3\frac{1}{2}$ рода в металлах. Интересно, что аномалия в восприимчивости $\chi_{zz}(\Delta\varepsilon_F) \propto (\Delta\varepsilon_F)^{-1/2}$ имеет тот же тип, что и особенность в термо-э.д.с. при электронных топологических переходах $2\frac{1}{2}$ рода [3].

Согласно (4) и (5), в слабых магнитных полях расходимость восприимчивости ограничивается для малых значений $\Delta \varepsilon_F$ таких, что $\Delta \varepsilon_F \lesssim T$. Следовательно, для амплитуды пика в восприимчивости имеем $|\chi_{zz}|_{\max} \propto 1/T^{1/2}$. С ростом магнитного поля H, когда расстояние между уровнями Ландау электрона становится больше температуры, амплитуда пика определяется этим расстоянием, и оказывается, что $|\chi_{zz}|_{\max} \propto M^{-1/4}$ [14]. В заключение отметим, что точки электронных топологических переходов $3\frac{1}{2}$ рода, критиче-

ские энергии которых близки к уровню Ферми, должны существовать в бериллии, алюминии и графите.

3. Магнитная восприимчивость бериллия

На рис. 4 показана зона Бриллюэна бериллия и часть его поверхности Ферми, так называемая дырочная корона второй зоны. Внутри этой короны проходит линия вырождения второй и третьей электронных энергетических зон. Минимум общей энергии этих зон ε_c достигается в точках пересечения этой линии с осями Σ (осями Γ M). Для краткости будем называть в дальнейшем эти точки пересечения Σ -точками. На осях Γ M ширина шейки короны очень мала, и поэтому в точках Σ при сравнительно небольшом изменении уровня Ферми должен происходить электронный топологический переход $3\frac{1}{2}$ рода. Этот переход в бериллии показан на рис. 1.

Температурные зависимости магнитной восприимчивости χ бериллия были исследованы в работе [6]. Было обнаружено, что если магнитное поле направлено вдоль вертикального ребра КН зоны Бриллюэна, то компонента восприимчивости вдоль этого ребра χ_{\parallel} практически не изменяется с температурой. Если магнитное поле лежит в базисной плоскости кристалла, магнитная восприимчивость в этой плоскости χ_{\perp} проявляет необычную температурную зависимость: ее модуль возрастает с увеличением T, достигает своего максимума при температуре $T \approx 870$ К и затем убывает (рис. 5).

Расчет магнитной восприимчивости бериллия проводился в работах [6,15]. Авторы этих работ вычисляли вклад в магнитную восприимчивость бериллия электронных состояний, расположенных в окрестностях Σ -точек, но не связывали эти точки с электрон-

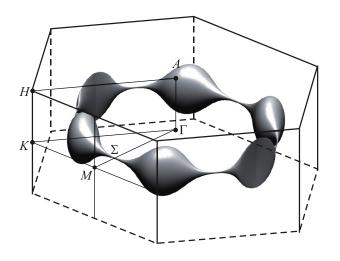


Рис. 4. Зона Бриллюэна бериллия и часть его поверхности Ферми: дырочная «корона» второй энергетической зоны. Линия вырождения второй и третьей зон проходит внутри «короны».

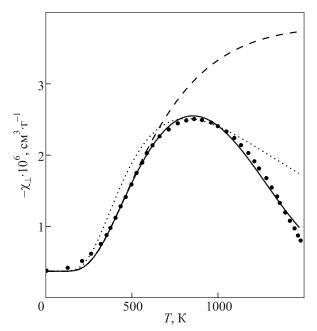


Рис. 5. Температурная зависимость удельной магнитной восприимчивости χ_{\perp} бериллия в базисной плоскости. Точки — эксперимент [6]. Сплошная, штриховая и пунктирная кривые рассчитаны по формулам (7), (4), (8), (9) с параметрами, приведенными на рис. 6 для соответствующих кривых. Здесь $\chi_{\perp}^{0} \approx -0.37 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{3} \cdot \text{г}^{-1}$; $A/\rho = 342 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{3} \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{г}^{-1}$ для сплошной и штриховой кривых, и $A/\rho = 560 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{3} \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{г}^{-1}$ для пунктирной кривой.

ным топологическим переходом $3\frac{1}{2}$ рода. Хотя при низких температурах в работах [6,15] была получена зависимость типа $\chi_{\perp} \propto (\mu - \varepsilon_c)^{-1/2}$, имеются отличия выведенных в этих работах формул от выражения (4). В частности, в эти формулы явно входит параметр, который задает размер области рассматриваемых электронных состояний вдоль линии вырождения зон и который отсутствует в (4). В настоящей работе, чтобы доказать существование точки электронного топологического перехода $3\frac{1}{2}$ рода в бериллии, мы заново анализируем экспериментальные данные [6] с помощью формулы (4).

Согласно существующим расчетам электронного энергетического спектра бериллия, химический потенциал μ электронов в этом металле лежит при T=0 ниже энергии ε_c . При нулевой температуре μ совпадает с ε_F , и можно оценить разность $\varepsilon_F-\varepsilon_c$, используя данные работы [16] по экстремальным сечениям поверхности Ферми бериллия и его циклотронным массам. Для магнитного поля вдоль шейки «короны» спектр (1) при $p_z=0$ приводит к следующим выражениям для площади $S_m(\varepsilon_F)$ минимального сечения этой «короны» и для соответствующей циклотронной массы $m_*(\varepsilon_F)$:

$$S_m(\varepsilon_F) = \frac{\pi(\varepsilon_F - \varepsilon_c)^2}{\sqrt{b_{xx}b_{yy}}}, \quad m_*(\varepsilon_F) = \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{\sqrt{b_{xx}b_{yy}}}.$$
 (6)

Из этих формул следует, что $\varepsilon_F - \varepsilon_c = S_m/(\pi m_*)$. Используя данные [16], получаем оценку $\varepsilon_F - \varepsilon_c \approx -8.8\,$ мРб.

Формула (4) описывает магнитную восприимчивость с точностью до постоянного слагаемого, которое не зависит от температуры и определяется электронными состояниями, расположенными далеко от точки электронного топологического перехода. Электронные состояния, лежащие в окрестностях шести точек Σ «короны» бериллия, вносят вклад $3\chi_{zz}$ в магнитную восприимчивость в базисной плоскости кристалла, если эта восприимчивость рассчитана на единицу объема. Тогда для удельной восприимчивости χ_{\perp} имеем:

$$\chi_{\perp} = 3 \frac{\chi_{zz}}{\rho} + \chi_{\perp}^{0}, \tag{7}$$

где $\rho=1,85$ г/см³ — плотность бериллия, χ_{zz} задается формулой (4), а χ^0_\perp — упомянутое постоянное слагаемое в χ_\perp . Поскольку при низкой температуре и отрицательной разности $\varepsilon_F-\varepsilon_c$ магнитная восприимчивость χ_{zz} стремится к нулю, находим из экспериментальных данных рис. 5, что $\chi^0_\perp \approx -0,37\cdot 10^{-6}$ см³/г.

Чтобы описать температурную зависимость магнитной восприимчивости х і, необходимо знать зависимость химического потенциала от температуры, $\mu(T)$. Зависимость $\mu(T)$ в значительной степени обусловлена тепловым расширением бериллия при его нагревании и изменением кристаллического потенциала из-за тепловых колебаний его атомов [17]. Чтобы получить представление о направлении сдвига μ относительно ϵ_c , учтем, что сечение $S_m(\varepsilon_F)$ убывает с ростом внешнего давления, т.е. при сжатии кристалла [18,19]. Поэтому можно ожидать, что при повышении температуры площадь $S_m(\varepsilon_F)$ растет, а химический потенциал, следовательно, удаляется от ε_c . Иными словами, разность $\mu(T)$ – ε_c увеличивается по абсолютной величине с ростом температуры. Отметим, что о росте площади сечения $S_m(\varepsilon_F)$ с повышением температуры свидетельствуют и результаты расчета [17], выполненного для $T \le 300 \text{ K}.$

Представим зависимость $\mu(T)$ в виде разложения по степеням температуры:

$$\mu(T) = \mu(0)(1 + \mu_1 \cdot T + \mu_2 \cdot T^2 + \mu_3 \cdot T^3 + \mu_4 \cdot T^4), \quad (8)$$

где $\mu(T)$ — химический потенциал электронов, отсчитанный от энергии ε_c , и $\mu(0) = -8,8$ мРб. Что касается постоянных коэффициентов μ_1 , μ_2 , μ_3 и μ_4 , рассмотрим три модели температурного поведения μ . В первой модели (штриховые линии на рис. 5 и 6) предположим, что μ изменяется линейно с температурой, т.е. $\mu_2 = \mu_3 = \mu_4 = 0$. Коэффициент μ_1 выбираем из условия минимального отклонения прямой $\mu(T)/\mu(0)$ от значений $r_{\text{tripp}}(200) = \sqrt{114/110} \approx 1,018$ и $r_{\text{tripp}}(300) = \sqrt{123/110} \approx 1,057$, полученных в [17] для отношения $\mu(T)/\mu(0)$ при температурах T = 200 и 300 К соответственно.

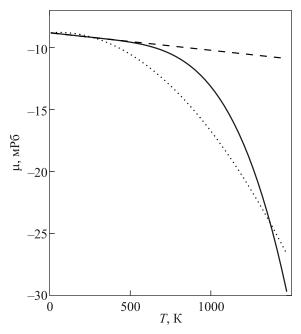


Рис. 6. Температурная зависимость химического потенциала μ бериллия, вычисленная по формуле (8). Здесь μ отсчитывается от энергии ϵ_c и $\mu(0)=-8,8$ мРб. Сплошная кривая: $\mu_1=1,4714\cdot 10^{-4}~\mathrm{K}^{-1},~\mu_2=1,5830\cdot 10^{-7}~\mathrm{K}^{-2},~\mu_3==-6,2570\cdot 10^{-10}~\mathrm{K}^{-3}$ и $\mu_4=8,1341\cdot 10^{-13}~\mathrm{K}^{-4}$. Штриховая кривая: $\mu_1=1,6028\cdot 10^{-4}~\mathrm{K}^{-1}$ и $\mu_2=\mu_3=\mu_4=0$. Пунктирная кривая: $\mu_1=-1,1265\cdot 10^{-4}~\mathrm{K}^{-1},~\mu_2=1,0137\cdot 10^{-6}~\mathrm{K}^{-2}$ и $\mu_3=\mu_4=0$.

Отметим, что найденное значение $\mu_1 \approx 1,60 \cdot 10^{-4}~{\rm K}^{-1}$ приводит к правильному порядку величины производной площади $S_m(\varepsilon_F)$ по давлению, измеренной в [18], если пересчитать изменение объема кристалла при нагревании в соответствующее изменение давления. Коэффициент

$$A = \frac{e^2}{2\pi^2 c^2 \hbar} \left(\frac{b_{xx} b_{yy}}{|B|} \right)^{1/2} (1 - \tilde{a}^2)^{3/2}, \tag{9}$$

определяющий амплитуду вклада $3\chi_{zz}$ в магнитную восприимчивость, находим из условия максимально хорошего согласования рассчитанной зависимости $\chi_{\perp}(T)$ с экспериментальными данными на участке, где величина $|\chi_{\perp}(T)|$ растет. В результате получаем: $(A/\rho) = 342 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3 \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{г}^{-1}$. Во второй модели (пунктирные линии на рис. 4 и 5) µ изменяется квадратично с температурой, т. е. $\mu_3 = \mu_4 = 0$. Коэффициенты μ_1 и μ_2 выбираем из условия, что парабола $\mu(T)/\mu(0)$ проходит через точки $r_{\text{tripp}}(200)$ и $r_{\text{tripp}}(300)$, полученные в работе [17]. Коэффициент А подбирался так, чтобы максимумы $|\chi_{\perp}(T)|$ для экспериментальной и рассчитанной кривых совпадали. Это требование дает: $(A/\rho) = 560 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3 \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{г}^{-1}$. Подчеркнем, что первая и вторая модели основаны на неявном предположении, что рост $\mu(T)/\mu(0)$ при всех температурах происходит по одному и тому же закону. Это предположение едва оправдано во всем интервале температур

0 < T < 1500 K, учитывая, что дебаевская температура бериллия порядка 1250 К [17]. Наконец, в третьей модели (сплошные линии на рис. 5 и 6) параметры $\mu_1 - \mu_4$ подбирались, исходя из требования, чтобы рассчитанная магнитная восприимчивость максимально хорошо описывала форму экспериментальной кривой $\chi_{\perp}(T)$ на рис. 4. При этом накладывалось ограничение, что в области низких температур функция $\mu(T)/\mu(0)$ должна практически совпадать с линейной зависимостью этого отношения в первой модели. Коэффициент A опять подбирался так, чтобы амплитуды максимумов для экспериментальной и рассчитанной магнитных восприимчивостей совпадали. Это достигается при том же значении $(A/\rho) = 342 \cdot 10^{-6}$ см³·К^{1/2}·г⁻¹, что и для первой модели. Отметим, наличие членов $\mu_2 T^2$ и $\mu_4 T^4$ в (8) позволяет считать, что эта формула учитывает и сдвиг химического потенциала, обусловленный температурным уширением фермиевского распределения электронов.

Параметры энергетического спектра (1) и их зависимости от температуры рассчитывались в работе [6] методом нелокального псевдопотенциала. Если вычислить коэффициент A по этим параметрам, то получим значение $(A/\rho) = 347 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3 \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{r}^{-1}$, которое фактически совпадает с найденным для первой и третьей моделей. Кроме того, интересно отметить, что при изменении температуры вычисленный коэффициент A остается постоянным с точностью до нескольких процентов, хотя параметры спектра, определяющие A, заметно изменяются с температурой [6].

Несмотря на то, что при изменении температуры химический потенциал $\mu(T)$ в (9) не только не пересекает критическую энергию ε_c , но и удаляется от нее, мы получили рост $|\chi_{+}(T)|$ при увеличении температуры для всех трех моделей поведения $\mu(T)$. Такое поведение магнитной восприимчивости связано с тем, что отношение $[\mu(T)/T] < 0$, которое входит в аргумент функции F в (4), растет с температурой, и рост этой функции $F(\mu/T)$ не компенсируется уменьшением множителя $T^{-1/2}$ в области не слишком высоких температур. Таким образом, необычная температурная зависимость магнитной восприимчивости, экспериментально обнаруженная в [6], связана с близостью уровня Ферми бериллия к точке электронного топологического перехода 3½ рода и является косвенным доказательством существования этой точки.

Чтобы непосредственно наблюдать электронный топологический переход в бериллии, необходимо сжимать кристалл. Согласно данным [18], этот переход
наступит при давлениях примерно 200-250 кбар, так
как с ростом давления химический потенциал электронов будет приближаться к ε_c . При этом магнитная восприимчивость χ_{\perp} будет расти по абсолютной величине. Если температура низкая, то рост восприимчивости
будет очень резким и проявится только в непосредст-

венной окрестности топологического перехода. В точке перехода при температуре 20 К магнитная восприимчивость, по нашей оценке, может достичь значения порядка $-60 \cdot 10^{-6}$ см³/г.

4. Заключение

Необычная температурная зависимость магнитной восприимчивости бериллия, обнаруженная в работе [6], свидетельствуют о том, что в этом металле вблизи уровня Ферми лежит точка электронного топологического перехода $3\frac{1}{2}$ рода. Именно эта точка определяет температурную зависимость магнитной восприимчивости бериллия.

Аналогичные электронные топологические переходы должны существовать в алюминии и графите. В частности, в сплавах алюминия с магнием или цинком [20], а также с литием [21] действительно наблюдался пик в концентрационной зависимости магнитной восприимчивости этих сплавов. Авторы работ [20,21] связывали такое поведение восприимчивости с точкой вырождения двух электронных энергетических зон на оси WX зоны Бриллюэна алюминия. Эта точка лежит на линии случайного вырождения зон, перпендикулярной WX, и, как показывает анализ, является точкой электронного топологического перехода 3½ рода. Таким образом, в работах [20,21] фактически был обнаружен этот переход в алюминии. Проявления электронных топологических переходов 3½ рода в графите будет теоретически рассмотрены в отдельной работе.

- 1. И.М. Лифшиц, ЖЭТФ 38, 1569 (1960).
- 2. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, Электронная теория металлов, Наука, Москва (1971).
- 3. A.A. Varlamov, V.S. Egorov, and A.V. Pantsulaya, *Adv. Phys.* **38**, 469 (1989).
- 4. Ya.M. Blanter, M.I. Kaganov, A.V. Pantsulaya, and A.A. Varlamov, *Phys. Rep.* **245**, 159 (1994).
- 5. G.P. Mikitik and Yu.V. Sharlai, *Phys. Rev. B* **90**, 155122 (2014).
- 6. Г.Е. Гречнев. И.В. Свечкарев, Ю.П. Середа, ЖЭТФ **75**, 993 (1978).
- 7. C. Herring, Phys. Rev. 52, 365 (1937).
- 8. D.A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids*, Plenum, New York (1986).
- 9. G.P. Mikitik and Yu.V. Sharlai, *Phys. Rev. B* **73**, 235112 (2006).
- 10. Г.П. Микитик, Ю.В. Шарлай, *ЖЭТФ* **114**, 1375 (1998).
- 11. G.P. Mikitik and Yu.V. Sharlai, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2147 (1999).
- 12. Г.П. Микитик, Ю.В. Шарлай, *ФНТ* **33**, 586 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 439 (2007)].
- 13. Г.П. Микитик, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **15**, 295 (1989) [*Sov. Low Temp. Phys.* **15**, 165 (1989)].
- 14. Г.П. Микитик, Ю.В. Шарлай, *ФНТ* **22**, 762 (1996) [*Low Temp. Phys.* **22**, 585 (1996)].

- 15. Г.Е. Гречнев, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **3**, 770 (1977) [*Sov. Low Temp. Phys.* **3**, 374 (1977)].
- J.H. Tripp, P.M. Everett, W.L. Gordon, and R.W. Stark, *Phys. Rev.* 180, 669 (1969).
- 17. J.H. Tripp, Phys. Rev. B 1, 550 (1970).
- 18. J.E. Schiber and W.J. O'Sullivan, *Phys. Rev.* **184**, 628 (1969).
- 19. Н.Б. Брандт, Е.С. Ицкевич, Н.Я. Минина, *УФН* **104**, 459 (1971).
- 20. С.А. Воронцов, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **13**, 274 (1987) [*Sov. Low Temp. Phys.* **13**, 155 (1987)].
- 21. В.А. Десненко, С.Н. Доля, Н.В. Исаев, И.В. Свечкарев, А.В. Федорченко, *ФНТ* **30**, 568 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 425 (2004)].

Electron topological transitions of 31/2 kind in beryllium

G.P. Mikitik and Yu.V. Sharlai

Experimental data on the temperature dependence of the magnetic susceptibility of beryllium are known from literature. We analyze these data. It is shown that this dependence can be explained if one takes into account that there is a point of the electron topological transition of $3\frac{1}{2}$ kind near the Fermi level in beryllium.

PACS: **71.30.+h** Metal-insulator transitions and other electronic transitions; **71.18.+y** Fermi surface: calculations and measurements; effective mass, *g*-factor.

Keywords: electron topological transition, band-contact line, magnetic susceptibility, beryllium.